



TITLE:

スピン-ボソン系の量子論的ランジュ
ュヴァン力学(基研モレキュール型
研究会「進化の力学への場の理論
的アプローチ」報告,研究会報告)

AUTHOR(S):

都築, 俊夫

CITATION:

都築, 俊夫. スピン-ボソン系の量子論的ランジュヴァン力学(基研モレ
キュール型研究会「進化の力学への場の理論的アプローチ」報告,研究
会報告). 物性研究 1989, 52(5): 513-530

ISSUE DATE:

1989-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/93670>

RIGHT:

スピナーボソン系の量子論的ランジュヴァン力学

東北大・理 都築俊夫

§1. 序

熱浴に接した二準位系の動力学を量子論的ランジュヴァン方程式の方法を用いて論じようという試みの報告である。

二準位系は物理学における基本模型のひとつであるから長い研究の歴史がある。量子系に視点を置くと、熱浴を光子気体とすれば QED や量子光学の問題であり、熱浴を格子振動子系と取ればポーラロン問題等々である。最近、巨視的量子現象の模型として改めて活発な研究がなされている。しかしながら、それは以前の研究の異なった課題における繰り返しではなく、系と熱浴との相互作用を摂動論的に扱うことも、単純な変分法による扱いも許さない質的に新しく困難な問題としてである。研究は Leggett を中心に Illinois グループ、SUNY グループおよびイギリス、フランス、西ドイツの研究者達によって ITP(UC, Santa Barbara) の計画研究として精力的に進められ、その成果は総合報告(文献 [1])として公表されている。この研究における主要な方法は実時間経路積分法 [2] である。この方法によって熱浴の力学変数を正確に消去し、その結果から適用条件の明確な近似理論を確立しようとしている。しかしその物理的意味となると必ずしも明かではなく(と筆者には思われる)、異なった観点からの研究がなされる必要がある。本研究がそのような研究のひとつであれば幸いである。なお、実時間経路積分法を用い、統計力学的側面に焦点を置いた高温展開理論が谷村一久保(慶応大)によって展開されている [3]^(註)。

§2. 問題の定立

全系のハミルトニアンはスピナーボソンハミルトニアン

$$H = H_S + H_B + H_{S-B}, \quad (1)$$

$$H_S = -\hbar\Delta\sigma_x, \quad (2)$$

(注) 汎関数積分法による量子論的ブラウン運動の理論の総合報告が最近出た [4]。また文献 [5] は [1] と合わせ読むとよい。

$$H_B = \sum_j \hbar \omega_j (b_j^\dagger b_j + \frac{1}{2}), \quad (3)$$

$$H_{S-B} = \frac{1}{2} \hbar \sigma_z u, \quad (4)$$

$$u = \sum_j \frac{\lambda_j}{\hbar} (b_j^\dagger + b_j), \quad (5)$$

で与えられるとする。ここで $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ はパウリのスピン行列、 j はボソンの量子数 (の組)。系 H_S は熱浴 H_B と H_{S-B} によって相互作用している。

今仮に $H_{S-B} = 0$ とする。 σ_z の運動方程式は

$$\ddot{\sigma}_z(t) + (2\Delta)^2 \sigma_z(t) = 0, \quad (6)$$

となる。 z 方向に量子化軸をとり、初期時刻 $t = 0$ にスピンを上向きに設定すれば、 H_S の形から上向き状態は基底状態と励起状態の重ね合わせだから、上向き状態の発見確率 $P_\uparrow(t)$ は

$$P_\uparrow(t) = \frac{1}{2} \{1 + \cos 2\Delta t\}, \quad (7)$$

と振動する。これは量子干渉性の例であり、(6) はその演算子表現である。系 H_S に熱浴 H_B を H_{S-B} によって接したとき、量子干渉性はどのような影響を受けるかというのが我々の問題である。初期条件を明確にして

[問題定立] $t < 0$ において適当な外部拘束によってスピンは上向き状態にあり、熱浴はこの拘束条件下で熱平衡 $\exp[-\beta\{H_B + \langle \uparrow | H_{S-B} | \uparrow \rangle\}] = \langle \uparrow | \exp[-\beta(H_B + H_{S-B})] | \uparrow \rangle$, $\beta = 1/k_B T$, にあったとする。 $t = 0$ にこの拘束を解いたとき、 $t > 0$ でのスピンの動力学を問う。(6) はどのように修正されるか? $P_\uparrow(t)$ はどのように振舞うか?。無論スピンを下向きに拘束するとしてもよい。この問題を調べるには熱浴のスペクトル強度分布が必要である。 H_{S-B}

が熱浴変数に関して一次依存だから

$$\sum_j \left(\frac{\lambda_j}{\hbar}\right)^2 \delta(\omega_j - \omega) = 2\alpha J(\omega), \quad (8)$$

を定めれば十分である。ここでは

$$J(\omega) = \omega e^{-\omega/\omega_c}, \quad (9)$$

とする。低振動数領域で $J(\omega) \propto \omega$ が重要である。系が一個の重い古典的粒子とすれば、ブラウン運動の問題（この場合 σ_z は粒子の位置座標）に帰するが、(9) の場合に白色極限 ($\omega_c \rightarrow \infty$) において、ブラウン運動のランジュヴァン方程式を得られるからである。即ち、熱浴を連結調和振動子系によってモデル化するとき、(4) と (8), (9) によって経験法則とつながる [6] [7]。我々の二準位系 H_S も同じ性質の熱浴と接しているとする。少し離れたが、 λ_j はエネルギーの次元を持つので α は無次元散逸係数であり、 ω_c は相互作用の切断振動数である。スピン系の固有特性振動数 2Δ と系の温度とは

$$\frac{k_B T}{\hbar} \ll 2\Delta \ll \omega_c, \quad (10)$$

の不等式を充すとする。温度に関する条件は系の動力学がほとんど量子力学的過程（トンネリング）によって支配されることを意味する。

次章に問題を解ための物理的指針を述べるが、その前に全系のハミルトニアンにユニタリー変換

$$U \equiv \exp\left[\frac{1}{2}\sigma_z v\right], \quad (11)$$

$$v \equiv \sum_j \frac{\lambda_j}{\hbar\omega_j} (b_j^\dagger - b_j) \quad (12)$$

を施しておく。

$$\tilde{H} \equiv U H U^{-1} = \tilde{H}_S + \tilde{H}_B \quad (13)$$

$$\tilde{H}_S \equiv U H_S U^{-1} = -\frac{1}{2} \hbar \Delta \{e^v \sigma_+ + e^{-v} \sigma_-\}, \quad (14)$$

$$\tilde{H}_B = U(H_B + H_{S-B})U^{-1} = \sum_j \hbar \omega_j (b_j^\dagger b_j + \frac{1}{2}). \quad (15)$$

これは相互作用 H_{S-B} によって振動子の振動中心が絶えず変動する効果を取り入れて、変位したボソンによって熱浴を記述しようとするものである。即ち、ボソンはスピンの運動に完全に追随するという断熱極限から問題を考えることになる。この新しい表現では系と熱浴との相互作用は \tilde{H}_S 中に含まれており、 $\tilde{H}_S - H_S$ がそれである。この変換に対して σ_z は不変である。また初期条件における熱浴に関する平均は \tilde{H}_B による分布 $\exp[-\beta \tilde{H}_B]$ による平均となる。

変換後の運動方程式は

$$\dot{\sigma}_z(t) = i\Delta \{e^{v(t)} \sigma_+(t) - e^{-v(t)} \sigma_-(t)\}, \quad (16)$$

$$\dot{\sigma}_\pm(t) = \pm 2i\Delta e^{\mp v(t)} \sigma_z(t), \quad (17)$$

$$\dot{b}_j(t) + i\omega_j b_j(t) = \frac{\lambda_j}{2\hbar\omega_j} \dot{\sigma}_z(t), \quad (18)$$

および (18) のエルミット共役である。

§3. 量子論的ランジュヴァン力学とは

具体的に話を進めるのが分かりやすい。(18) を初期条件 $b_j(0) = b_j$ で積分形に書き直すと

$$b_j(t) = b_j e^{-i\omega_j t} + \frac{\lambda_j}{\hbar\omega_j} \int_0^t dt' e^{-i\omega_j(t-t')} \dot{\sigma}_z(t'). \quad (19)$$

この表式の右辺の各項の意味を考えてみよう。第一項はボソンの自由運動であり、状態 j の存在確率はカノニカル分布（ガウス分布）によって与えられている。第二項は系との相互作用による分極である。初期時刻の正準交換関係 $[b_j, b_k^\dagger] = \delta_{j,k}$ は分極項を含めて初めて任意の時刻 t においても維持される。このことはあたりまえのことだが、はっきりと認識することが極めて大切

である [8,9,10]。この分極はスピン（系の力学変数）に対する運動方程式に反作用場を作り出す。スピンの運動方程式には $v(t)$ で現れる。 $v(t)$ は

$$v(t) = g(t) + iv_R(t), \quad (20)$$

$$g(t) \equiv \sum_j \frac{\lambda_j}{\hbar \omega_j} \{b_j^+ e^{i\omega_j t} - b_j e^{-i\omega_j t}\}, \quad (21)$$

$$v_R(t) \equiv \int_0^t dt' \sum_j \left(\frac{\lambda_j}{\hbar \omega_j}\right)^2 \sin \omega_j(t-t') \cdot \dot{\sigma}_z(t'), \quad (22)$$

となる。後に変位ボソンによって定義された $u(t)$ が必要となるので、それを書く

$$u(t) = f(t) + u_R(t), \quad (23)$$

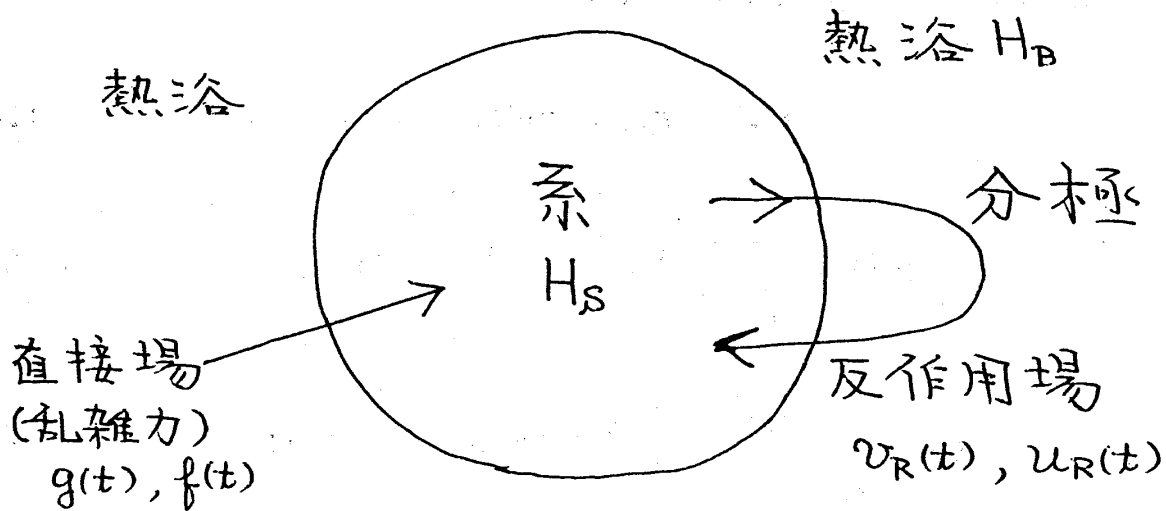
$$f(t) \equiv \sum_j \frac{\lambda_j}{\hbar} \{b_j^+ e^{i\omega_j t} + b_j e^{-i\omega_j t}\}, \quad (24)$$

$$u_R(t) \equiv \int_0^t dt' \sum_j \left(\frac{\lambda_j}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{\omega_j} \cos \omega_j(t-t') \cdot \dot{\sigma}_z(t'), \quad (25)$$

となる。

$v(t)$ をスピンの運動方程式に代入すれば $\dot{\sigma}(t)$ と $g(t)$ とによる閉じた方程式系となる。 $g(t)$ の時間発展は既知である。この方程式がランジュヴァン方程式 [6, 11, 12] である。内容を模式的に書くと図の様に表せよう [13, 14, 15]。熱浴の場は直接場と反作用場に分けることが出来、直接場は乱雑力となり、反作用場は一般に記憶をもつフィードバック効果を与える。^(注)

(注) 系が多自由度系であり、その遅い運動に注目している場合には、速い運動モードは熱浴の一部となる。抽象的には簡単だが、実際に直接場と反作用場に分けることは簡単とはいえない。その一般論として森の方法 [16] を、また柴田等による新たな興味深い発展 [17, 18] を挙げておく。



これまで述べてきた考え方は古典系に対しても量子系に対しても適用出来る。量子系である場合は古典系である場合とどう違うのであろうか。一言でいえばランジュヴァン方程式は演算子方程式であるということになる。即ち、交換関係が指定されなければ力学は決まらない。当り前のことであるがその意味するところは簡単ではない。複雑さは系の力学変数 $\vec{\sigma}(t)$ は全系のハミルトニアンで時間発展するハイゼンベルク演算子であるが、直接場 $g(t), f(t)$ は熱浴の自由発展による場であることに由来する。 $\vec{\sigma}(t)$ は同時刻の $v(t), u(t)$ と交換するが、例え同時刻であっても $g(t), f(t)$ とは可換ではないのである。それらの交換関係は $[\vec{\sigma}(t), g(t)] = -[\vec{\sigma}(t), i v_R(t)]$, $[\vec{\sigma}(t), f(t)] = -[\vec{\sigma}(t), u_R(t)]$ となる。重ねて強調するが、量子系においては系の力学変数と乱雑場（直接場）とは一般に互いに独立ではない。これに加えて、直接場の異時刻交換関係も可換でない。量子系であるということはこれらの交換関係にある。このようなランジュヴァン方程式に支配される動力学を量子論的ランジュヴァン力学 (QLD, Quantum Langevin Dynamics) と呼ぶことにする。なお、量子論的ランジュヴァン方程式について適当な参考文献を知らないが、ここでは [19, 20] を挙げておく。

§4. 反作用場

熱浴のスペクトル強度分布 (9) を白色 ($\omega_c \rightarrow \infty$) とみなすことは古典系に対しても量子

系に対しても広く受け入れられている近似である。この場合には反作用場は即応型になる。(8), (9) を用いると (22), (25) は

$$v_R(t) = 2\alpha \int_0^t dt' \Phi(t-t') \sigma_z(t') - 2\alpha K(t) \sigma_3$$

$$u_R(t) = 2\alpha \int_0^t dt' \Phi(t-t') \dot{\sigma}_z(t')$$

となる。 $v_R(t)$ を導く際一度部分積分を行った。 $\sigma_3 \equiv \sigma_z(0)$ であり、 $K(t)$ と $\Phi(t)$ は

$$K(t) \equiv \int_0^t dt' \Phi(t') = \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \sin \omega t = \tan^{-1} \omega_c t, \quad (26)$$

$$\Phi(t) \equiv \frac{\partial K(t)}{\partial t} = \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega t = \frac{\omega_c}{1 + (\omega_c t)^2}, \quad (27)$$

である。 $\omega_c \rightarrow \infty$ とすれば $\Phi(t) \rightarrow \pi \delta(t)$ となる。 $\sigma_z(t)$ は遅い変数だから

$$v_R(t) = 2\alpha K(t) \{ \sigma_z(t) - \sigma_3 \}, \quad (28)$$

$$u_R(t) = 2\alpha K(t) \dot{\sigma}_z(t), \quad (29)$$

は初期時刻領域を含むすべての時刻に対して良い近似である。 $t \rightarrow 0$ とすれば反作用場は $K(t) \rightarrow 0$ によっていずれも 0 となる。 $\omega_c t \rightarrow \infty$ とすれば $K(t) \rightarrow \pi/2$ だから

$$v_R(t) \rightarrow \pi\alpha \{ \sigma_z(t) - \sigma_3 \}, \quad (30)$$

$$u_R(t) \rightarrow \pi\alpha \dot{\sigma}_z(t), \quad (31)$$

となる。これらは $t \lesssim 1/\omega_c$ である短い初期時刻領域を除いて有効な近似式である。このことから反作用場は遅い変化をするとみなしてよい。しかし $v(t), u(t)$ は速い変数 $g(t), f(t)$ を含んでいる。

§5. 量子論的ランジュヴァン方程式 (I)

我々の系に対する量子論的ランジュヴァン方程式 (QLE) を導く方法はいくつかありえよう。方法が異なれば QLE の表式も異なってよい。ここでは $\sigma_z(t)$ に対するふたつの QLE を導出する。そのひとつ QLE(I) は一階微分・積分方程式となるもので、第一型 QLE と呼ぶことにする。もうひとつ QLE(II) は二階微分・積分方程式となり、第二型 QLE と呼ぶ。それぞれは QLD の異なった側面を見せてくれる。QLE(I) は既存の理論 [1, 5] が何をしたか、何が問題かを教えてくれる。QLE(II) は二準位系に内在する優れて量子力学的特質を教えてくれる。

QLE(I) を導こう。これは $\sigma_{\pm}(t)$ に対する運動方程式 (17) を積分表示し、それらを (16) に代入して得られる。従って $v(t)$ が必要となる。 $v_R(t)$ に対する表式 (28) 又は (30) をまず運動方程式 (16) と (17) に代入することにする。以後 (30) の場合を書く。 $\sigma_z(t)$ と直接場 $g(t)$ との交換関係は

$$[\sigma_z(t), \bar{g}(t)] = 0, \quad (32)$$

$$\bar{g}(t) \equiv g(t) - i\pi\alpha\sigma_3, \quad (33)$$

であるから $\exp[\pm v(t)] = \exp[\pm\{\bar{g}(t) - i\pi\alpha\sigma_z(t)\}]$ は容易に $\sigma_z(t)$ の一次関数に変形できる。従って、運動方程式は

$$\dot{\sigma}_z(t) = i\Delta \cdot E \{e^{\bar{g}(t)}\sigma_+(t) - \bar{e}^{\bar{g}(t)}\sigma_-(t)\}, \quad (34)$$

$$\dot{\sigma}_{\pm}(t) = \pm 2i\Delta e^{\mp \bar{g}(t)} \{C\sigma_z(t) \mp iS\}, \quad (35)$$

となる。ここで $C \equiv \cos \pi\alpha$, $S \equiv \sin \pi\alpha$, $E \equiv e^{i\pi\alpha}$ である。 $\sigma_{\pm}(0) = \sigma_{\pm}$ として (34) から $\sigma_{\pm}(t)$ を消去すると

$$\dot{\sigma}_z(t) = i\Delta \{e^{g(t)}\sigma_+ - e^{-g(t)}\sigma_-\} - (2\Delta)^2 E \int_0^t dt' \{C\hat{\Xi}_+(t, t')\sigma_z(t') - iS\hat{\Xi}_-(t, t')\}, \quad (36)$$

$$\hat{\Xi}_{\pm}(t, t') \equiv \frac{1}{2} \{e^{g(t)} \cdot e^{-g(t')} \pm e^{-g(t)} \cdot e^{g(t')}\}. \quad (37)$$

これが演算子形式の QLE(I) である。直接場 (乱雑力) の相関は交換関係

$$[g(t), g(t')] = 2i\pi\alpha, t > t', \quad (38)$$

を用いて計算出来る。熱浴に対して設定された初期条件から $\langle e^{\pm g(t)} \rangle_B = 0$,

$$\langle e^{g(t)} \cdot e^{-g(t')} \rangle_B = \langle e^{-g(t)} \cdot e^{g(t')} \rangle_B = E^* \cdot e^{-2\alpha L(t-t')} \quad (39)$$

$$\begin{aligned} L(t) &\equiv \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^2} \{1 - \cos \omega t\} \coth \frac{1}{2}\beta\hbar\omega, \\ &= \frac{1}{2} \ln[1 + (\omega_c t)^2] + \sum_{l=1}^\infty \ln[1 + \left(\frac{\omega_c t}{1 + l\beta\hbar\omega_c}\right)^2], \end{aligned} \quad (40)$$

$$\cong \frac{1}{2} \ln[1 + (\omega_c t)^2] + \ln\left[\frac{\beta\hbar}{\pi t} \sinh\left(\frac{\pi t}{\beta\hbar}\right)\right]. \quad (41)$$

ここで $\langle \dots \rangle_B \equiv \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}_B} \dots\} / \text{Tr} e^{-\beta\hat{H}_B}$ 。近似 (41) に対して要求されている条件 $\beta\hbar\omega_c \gg 1$ は今の場合十二分に充されている。(39) 中の E^* は元々 $\exp[-2i\alpha K(t-t')]$ であった。任意個の異時刻 $e^{\pm g(t)}$ の相関は K と L を用いて完全に表現出来る。この意味で $e^{\pm g(t)}$ は一般化されたガウス過程を与える。

スピンの初期状態での期待値 $\sigma_{11}(t) \equiv \langle \uparrow | \sigma_z(t) | \uparrow \rangle$ に対する方程式は (36) から

$$\dot{\sigma}_{11}(t) = -(2\Delta)^2 E \int_0^t dt' \{C\hat{\Xi}_+(t, t')\sigma_{11}(t') - iS\hat{\Xi}_-(t, t')\}. \quad (42)$$

積分方程式に書換え、繰返し法により $(2\Delta)^2$ の巾級数で $\sigma_{11}(t)$ を求める。熱平均

$$p(t) \equiv \langle \sigma_{11}(t) \rangle_B \quad (43)$$

を取ると $\hat{\Xi}_-$ からの寄与はなく

$$p(t) = 1 + \sum_{l=1}^\infty (-)^l (2\Delta)^{2l} \int_0^t dt_{2l} \int_0^{t_{2l}} dt_{2l-1} \cdots \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 F_l(\{t_k\}), \quad (44)$$

$$F_l \equiv 2^{-l} (EC)^l \sum_{\eta_1=\pm 1} \cdots \sum_{\eta_l=\pm 1} \langle e^{\eta_l g(t_{2l})} \cdot e^{-\eta_l g(t_{2l-1})} \cdots e^{\eta_1 g(t_2)} \cdot e^{-\eta_1 g(t_1)} \rangle_B$$

$$= \left(\frac{C}{2}\right)^l \sum_{\{\eta_k = \pm 1\}} \exp[-2\alpha\{L(t_{2k} - t_{2k-1}) + \sum_{k=1}^{l-1} \sum_{j=k+1}^l \eta_j \eta_k \Lambda_{j,k}\}] , \quad (45)$$

$$\Lambda_{j,k} = L(t_{2j} - t_{2k-1}) - L(t_{2j} - t_{2k}) - L(t_{2j-1} - t_{2k-1}) + L(t_{2j-1} - t_{2k}) , \quad (46)$$

を得る。これは実時間経路積分法による結果 [1, 5] と、 $K(t) \rightarrow \pi/2$ に対応する置き換えをすれば完全に一致する。Leggett 達は級数解 (44) を詳しく検討し、noninteracting blip 近似 [1] (同じことだが dilute bounce gas 近似 [5]) を提案する。これはどのようなものであろうか。(42) の熱平均を取り切断近似

$$\langle \hat{\Xi}_+(t, t') \sigma_{11}(t') \rangle_B \rightarrow \langle \hat{\Xi}_+(t, t') \rangle_B \cdot p(t')$$

を導入しよう。(39) を用いて

$$\dot{p}(t) = -(2\Delta)^2 C \int_0^t dt' e^{-2\alpha L(t-t')} p(t') , \quad (47)$$

を得る。これは noninteracting blip 近似の結果に他ならない。(47) は別の考え方からも導ける。反作用場を完全に無視しよう。その場合 $\sigma_{11}(t)$ に対する方程式は (42) で $C = E = 1, S = 0$ とおいたものとなる。切断近似をすれば (47) を得る。このことから、noninteracting blip 近似を導入することは反作用場を無視することと同じであることが分かる。blip 間の相互作用が反作用場であるとも言える。反作用場を無視すれば、フィードバックが断たれているから量子干渉性は減衰せざるをえない。

第一型 QLE は正確に $\sigma_{\pm}(t)$ を (16) から消去し、その後で白色極限 (28) を代入することによって得ることも出来る。その結果は [14, 15]

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_z(t) = & i\Delta C E^* \{e^{g(t)} \sigma_+ - e^{-g(t)} \sigma_-\} \\ & - \Delta S E^* \sigma_z(t) \{e^{g(t)} \sigma_+ + e^{-g(t)} \sigma_-\} \\ & - (2\Delta)^2 \int_0^t dt' \{C^2 \hat{\Xi}_+(t, t') \sigma_z(t') + S^2 \sigma_z(t) \hat{\Xi}_+(t, t')\} \end{aligned}$$

$$-iCS[\hat{\mathbf{E}}_-(t, t') - \sigma_z(t)\hat{\mathbf{E}}_-(t, t')\sigma_z(t')]] \quad (48)$$

となり (36) とは一見して非常に異なる。(48) は (36) より正確と思われるので、熱浴の動的効果を正しく記述するためには白色極限をどの段階で導入すべきか検討を要する。

§6. 量子論的ランジュヴァン方程式 (II)

孤立系のとき H_S の示す量子干渉性は (6) で記述された。熱浴は (6) をどのように修正するだろうか。(16) を時間微分し (17) を用いると

$$\ddot{\sigma}_z(t) + (2\Delta)^2 \sigma_z(t) = -\frac{1}{2}\{u(t)W(t) + W(t)u(t)\}, \quad (49)$$

を得る。 $u(t)$ は予め §3 で導入した (23) である。 $u(t) = -i\dot{v}(t)$ の関係がある。また、

$$W(t) \equiv -\frac{2\tilde{H}_S}{\hbar} = \Delta\{e^{v(t)}\sigma_+(t) + e^{-v(t)}\sigma_-(t)\}, \quad (50)$$

である。 $W(t)$ の運動方程式は

$$\dot{W}(t) = u(t)\dot{\sigma}_z(t) - 2i\alpha\omega_c W(t), \quad (51a)$$

$$= \dot{\sigma}_z(t)u(t) + 2i\alpha\omega_c W(t), \quad (51b)$$

$$= \frac{1}{2}\{u(t)\dot{\sigma}_z(t) + \dot{\sigma}_z(t)u(t)\}. \quad (51c)$$

三通りに書いた理由は後で分かる。(49) に注目しよう。 $\sigma_z(t)$ は複合演算子 $W(t)$ を通して熱浴と結合している。 $W(t)$ が \tilde{H}_S そのものであることは、全系のハミルトニアン \tilde{H} は $\tilde{H}_S + \tilde{H}_B$ であるから、極めて興味深い。連立方程式 (49) と (51) は三変数 $\sigma_z(t)$, $W(t)$, $u(t)$ で閉じている。実際、同時刻交換関係を調べてみると

$$[\sigma_z, \dot{\sigma}_z] = 2iW, \quad (52a)$$

$$[\sigma_z, W] = -2i\dot{\sigma}_z, \quad (52b)$$

$$[\sigma_z, u] = 0, \quad (52c)$$

$$[u, \dot{\sigma}_z] = 4i\alpha\omega_c W, \quad (52d)$$

$$[u, W] = -4i\alpha\omega_c \dot{\sigma}_z, \quad (52e)$$

$$[\dot{\sigma}_z, W] = 8i\Delta^2 \sigma_z, \quad (52f)$$

となるからである。(51)の右辺の三つの表式は(52d)によってお互いに結ばれている。

特性振動数(特性時間)について考察しよう。 $\sigma_z(t)$ はその特性振動数が 2Δ 程度の遅い変数であった。 $W(t)$, $u(t)$ はどうであろうか。まず $u(t)$ について調べる。 $v(t)$ との交換関係を作ってみよう。

$$[u, v] = 4\alpha \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} = 4\alpha\omega_c, \quad (53)$$

を得る。非可換性の度合は熱浴の状態密度と系と熱浴との相互作用の強さで決まるスペクトル強度関数 $J(\omega)$ に依存している。我々の $J(\omega)$, (9), の場合には(53)のごとく $4\alpha\omega_c$ となる。仮に $J(\omega) = \omega(\omega/\omega_c)^{r-1} \cdot \exp[-\omega/\omega_c]$, ($r > 1$), とすれば、 $\Gamma(r)\alpha\omega_c$ となる。いずれにしても $\alpha\omega_c$ の程度である。ここで v は常に真性非線形演算子 $e^{\pm v}$ として現れることに注意しよう。従って v は無次元であり、スケール変換は意味をなさない。 $u = -iv$ であるから、交換関係(53)は $v(t)$ 従って $u(t)$ の特性振動数(正確には特性時間の逆数、以後この意味と了解されたい)が $\alpha\omega_c$ 程度であるということを意味する。弱相互作用極限($\alpha \rightarrow 0$)以外では $\alpha\omega_c \gg 2\Delta$ と考えてよいので $u(t)$, $v(t)$ は速い変数であることが分かる。更に(52d, e)を考慮すると $W(t)$ も $u(t)$ と同程度の速い変数となる。この予測はスピン演算子の交換関係のもとで残りの交換関係と矛盾しない。このようにして、我々の問題には遅い運動と速い運動があることが分かる。短い特性時間の出現は交換関係(53)と密接に係わっている。

このような考察からエルミット演算子 $W(t)$ に対して、対称化された(51c)ではなく、時間特性を著わにした(51a, b)を採用する。(49)の右辺の第一項に対して(51a)を、第二項にたいして(51b)を用いる。この時演算子 $u(t)$ が順又は逆時刻順序で現れるという計算上の利点もある。 $W(t)$ は、(51a)から、

$$W(t) = W(0)e^{-2i\alpha\omega_c t} + \int_0^t dt' e^{-2i\alpha\omega_c(t-t')} u(t') \dot{\sigma}_z(t')$$

ここで $W(0) = \Delta\{e^{g(0)}\sigma_+ + e^{-g(0)}\sigma_-\}$ 。 $u(t)$ を (23), (31) により代入し $[\dot{\sigma}_z(t)]^2 = (2\Delta)^2$ を用いると

$$W(t) = \int_0^t dt' e^{-2i\alpha\omega_c(t-t')} f(t') \dot{\sigma}_z(t') + W(0)e^{-2i\alpha\omega_c t} - \frac{2\pi i \Delta^2}{\omega_c} \{1 - e^{-2i\alpha\omega_c t}\}, \quad (54)$$

となる。 $\dot{\sigma}_z(t)W(t) + W(t)\dot{\sigma}_z(t) = 0$ に注意し、(54) とそのエルミット共役を代入して、(49) は次のようになる。

$$\begin{aligned} \ddot{\sigma}_z(t) + (2\Delta)^2 \sigma_z(t) + 2\alpha \int_0^t dt' G(t-t') \dot{\sigma}_z(t') \\ = -\frac{1}{2} \int_0^t dt' \{R(t, t') \dot{\sigma}_z(t') + \dot{\sigma}_z(t') R(t', t)\} - X(t), \end{aligned} \quad (55)$$

初期条件は $\sigma_z(0) = \sigma_3$, $\dot{\sigma}_z(0) = \dot{\sigma}_3 = i\Delta\{e^{g(0)}\sigma_+ - e^{-g(0)}\sigma_-\}$ 。直接場の二次項を平均 $\langle f(t)f(t') \rangle_B$ とその周りのゆらぎに分解し、

$$G(t-t') \equiv \frac{1}{4\alpha} \{e^{-2i\alpha\omega_c(t-t')} \langle f(t)f(t') \rangle_B + \text{c. c.}\}, \quad (56)$$

$$R(t, t') \equiv e^{-2i\alpha\omega_c(t-t')} \{f(t)f(t') - \langle f(t)f(t') \rangle_B\}, \quad (57)$$

と表した。また

$$X(t) \equiv \frac{1}{2} \{e^{-2i\alpha\omega_c t} f(t)W(0) + \text{h. c.}\} + \frac{\pi\Delta^2}{\omega_c} \sin 2\alpha\omega_c t \cdot f(t), \quad (58)$$

である。更に、 $\langle f(t) \rangle_B = 0$,

$$\langle f(t)f(t') \rangle_B = 2\alpha \int_0^\infty d\omega J(\omega) [n(\omega)e^{i\omega(t-t')} + \{1+n(\omega)\}e^{-i\omega(t-t')}] , \quad (59)$$

を用いると $G(t)$ は

$$G(t) = \int_0^\infty d\omega J(\omega) [n(\omega)\cos(\omega - 2\alpha\omega_c)t + \{1+n(\omega)\}\cos(\omega + 2\alpha\omega_c)t], \quad (60)$$

となる。ここで $n(\omega) = 1/[e^{\beta\omega} - 1]$ 。特性振動数 $2\alpha\omega_c$ をもつ補助場 $W(t)$ が $\sigma_z(t)$ と熱浴との相互作用を媒介したことにより、記憶関数 G 、乗法的雑音 R 、加法的雑音 X に振動数 $2\alpha\omega_c$

の変調を生じた。この変調作用は、今まで見て来たように、完全に量子力学的起源を持つものである。方程式 (55) が QLE(II) である。

§7. 切断近似

$\sigma_{11}(t)$ に対する方程式は (55) で $\sigma_z(t)$ を $\sigma_{11}(t)$ に置き換え、 $X(t)$ は (58) の最後の項のみを残せば得られる。更に熱浴に関する平均を取ると、加法的雑音はすべてに消失し、(55) の右辺は

$$-\frac{1}{2} \int_0^t dt' \langle R(t, t') \dot{\sigma}_{11}(t') + \dot{\sigma}_{11}(t') R(t', t) \rangle_B$$

となる。ここで切断近似を導入すると $\langle R(t, t') \rangle_B = 0$ だから $p(t) = \langle \sigma_{11}(t) \rangle_B$ に対して

$$\ddot{p}(t) + (2\Delta)^2 p(t) + 2\alpha \int_0^t dt' G(t-t') \dot{p}(t') = 0, \quad (61)$$

を得る。初期条件は $p(0) = 1$, $\dot{p}(0) = 0$ である。ラプラス変換

$$\tilde{p}(z) = \int_0^\infty dt e^{-zt} p(t), \quad \text{Re } z > 0$$

を行うと

$$\tilde{D}(z) \tilde{p}(z) = z + 2\alpha \tilde{G}(z), \quad (62)$$

$$\tilde{D}(z) = z^2 + (2\Delta)^2 + 2\alpha z \tilde{G}(z), \quad (63)$$

となる故、関数 $\tilde{D}(z)$ の零点が運動を決める。 $\tilde{G}(z)$ はどのような表式を持つであろうか。

$$\begin{aligned} \tilde{G}(z) &= \int_0^\infty dt e^{-zt} G(t) \\ &= z \int_0^\infty d\omega J(\omega) \left[\frac{1 + n(\omega)}{z^2 + (\omega + 2\alpha\omega_c)^2} + \frac{n(\omega)}{z^2 + (\omega - 2\alpha\omega_c)^2} \right] \end{aligned} \quad (64)$$

となり、変調作用が見やすくなっている。 $|z| \sim 2\Delta \ll 2\alpha\omega_c$ に注意すれば、 $T = 0$ では $n(\omega) = 0$ だから (64) の積分は定数とみなされる。これは変調作用のない場合 (積分 $\sim 1/z$)

とは非常に異なる。有限温度になると積分の前半は $(k_B T / 2\alpha \hbar \omega_c)^2$ の程度の定数補正をするのにすぎない。後半部分は $\omega \sim 2\alpha \omega_c$ 近傍から $1/z$ の寄与があるがその係数は $\exp[-2\alpha\beta\omega_c]$ 程度である。結局

$$\tilde{G}(z) = z[\tilde{G}_0(0) + \frac{1}{3}(\frac{\pi k_B T}{2\alpha \hbar \omega_c})^2] + 2\pi\alpha\omega_c e^{-2\alpha[\beta\hbar\omega_c+1]}, \quad (65)$$

となる。ここで $\tilde{G}_0(0) = -(1+2\alpha)Ei(-2\alpha)e^{2\alpha} - 1$ であり、その漸近形は $2\alpha \ll 1$ に対して $\ln(1/2\gamma\alpha) - 1$, $2\alpha \gg 1$ に対して $1/(2\alpha)^2$ である。また $\ln \gamma = 0.577$ はオイラ一定数。(65) を用いれば

$$\tilde{D}(z) = a^2[z^2 + 2\Gamma z + (2\tilde{\Delta})^2], \quad (66)$$

ここで $\tilde{\Delta} \equiv \Delta/a$,

$\Gamma \equiv (2\pi\alpha^2\omega_c/a^2)e^{-2\alpha[\beta\hbar\omega_c+1]}$, $a^2 \equiv 1 + 2\alpha[\tilde{G}_0(0) + (\pi k_B T / 2\alpha \hbar \omega_c)^2/3]$ である。 $2\alpha\omega_c \gg 2\Delta \gg k_B T/\hbar$ であり、 Γ は $2\alpha\beta\hbar\omega_c \gg 1$ によって $\Gamma \ll 2\tilde{\Delta}$ と考えてよいから $\tilde{D}(z)$ の零点は

$$z = \pm i\Omega - \Gamma, \Omega = [(2\tilde{\Delta})^2 - \Gamma^2]^{1/2}, \quad (67)$$

となる。ラプラス逆変換して $p(t)$ を求めると

$$p(t) = e^{-\Gamma t} \left\{ \cos \Omega t + \frac{\Gamma}{\Omega} \sin \Omega t \right\}, \quad (68)$$

$$= \cos \Omega t, \quad (T = 0)$$

$$= \left[1 + \left(\frac{\Gamma}{\Omega} \right)^2 \right]^{1/2} e^{-\Gamma t} \cos(\Omega t - \delta), \quad (T \neq 0)$$

となる。ここで $\delta = \tan^{-1}(\Gamma/\Omega)$ 。このように $T = 0$ では振動解となり減衰しない。 $T \neq 0$ (但し $\hbar\Omega \gg k_B T$) では振動減衰解となるが、 $1/\Gamma \propto e^{2\alpha\beta\hbar\omega_c} \gg \gg 1/\Omega$ 程の長時間を経なければ減衰は顕わにならず、位相のずれを受けた振動 $\cos(\Omega t - \Gamma/\Omega)$ とみなせる。これらは速い運動モードによる変調作用の結果である。このように、切断近似のもとで、量子干渉性は $T = 0$ では持続し、 $T \neq 0$ では実際上減衰しない ($t \rightarrow \infty$ とすれば減衰し消滅する)。乗法的雑音 R がこの結果をいかに修正するか非常に興味深い。今検討中である。

§8. 討論と結語

反作用場が果たすべき量子力学的並びに量子統計力学的役割を明らかにする目的で QLD を建設した。変位ボソン表示を用いて次のことを示した。

- (1) non-interacting blip 近似では反作用場を完全に無視している。従って熱浴から系へのフィードバックが断たれており量子干渉性は減衰せざるをえない。
- (2) 補助場 $W(t)$ が $\sigma_z(t)$ と熱浴との相互作用を媒介する唯一の場であること。それは交換関係から決まる特性振動数 $2\alpha\omega_c$ をもつ速い変数であること。その最も重要な役割は熱浴の直接場 (乱雑力) の作用を変調することにある。
- (3) 量子干渉性は、切断近似のもとで、 $T = 0$ では持続し、 $T \neq 0$ では實際上持続するとみなしてよい。

反作用場を無視したにもかかわらず non-interacting blip 近似が散逸を記述した理由は、スピンの代数の故に直接場が乗法的雑音となったからである。

絶対零度において量子干渉性が近似に依らず持続しうるものだろうか。 \tilde{H}_S に現れる演算子 $e^{\pm\tau}$ はコヒーレントボソンの生成演算子の積 [21,22] であることに注意しよう。それ故 \tilde{H}_S によって許されたスピン反転過程にはコヒーレントボソンの励起を伴うことになる。このことは多重スピン反転過程が遠赤外ボソンによってすらコヒーレントに起こりうることを示唆している。この着想に沿った定式化は、QLE(II) を解くこととともに、これからの課題である。

謝 辞

この研究の途中、著者の着想について久保亮五、恒藤敏彦、近藤淳、斯波弘行、柴田文明の諸先生に御討論、御批判いただきました。ここに感謝いたします。文献 13 は久保先生から教えていただきました。

この研究は文部省科学研究費一般研究 C の援助を受けています。

REFERENCES

1. A.J. Leggett, S. Chakravarty, A.T. Dorsey, M.P.A. Fisher, A. Garg and W. Zwerger, *Rev. Mod. Phys.* **59** (1987), 1.
2. R.P. Feynman and F.L. Veron, Jr., *Ann. Phys.* **24** (1963), 118.
3. Y. Tanimura and R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan* **58** (1989), 101.
4. H. Grabert, P. Schramm and G.-L. Ingold, *Phys. Rep.* **168** (1988), 115.
5. U. Weiss, H. Grabert and S. Linkwitz, *J. Low. Temp. Phys.* **68** (1987), 213.
6. G.W. Ford, M. Kac and P. Mazur, *J. Math. Phys.* **6** (1965), 504.
7. A.O. Caldeira and A.J. Leggett, *Ann. Phys.* **149** (1983), 374.
8. O.R. Senitzky, *Phys. Rev. Lett.* **31** (1973), 955.
9. P.W. Milonni, J.R. Ackerhalt and W.A. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **31** (1973), 958.
10. P.W. Milonni, *Phys. Rep.* **25** (1976), 1.
11. R. Zwanzig, *J. Stat. Phys.* **9** (1973), 215.
12. M.C. Wang and G.E. Uhlenbeck, *Rev. Mod. Phys.* **17** (1945), 323.
13. J. Dalibard, J. Dupont-Roc and C. Cohen-Tannoudji, *J. Physique* **43** (1982), 1617, and **45** (1984), 637.
14. T. Tsuzuki, *Solid State Commun.* **68** (1988), 499, and **69** (1989), 7.
15. T. Tsuzuki, *Prog. Theor. Phys.* **81** (1989), No.4.
16. H. Mori, *Prog. Theor. Phys.* **33** (1965), 127.
17. S. Chaturvedi and F. Shibata, *Z. Physik* **B35** (1979), 297.
18. F. Shibata and T. Arimitsu, *J. Phys. Soc. Japan* **49** (1980), 891.

19. R. Benguria and M. Kac, Phys. Rev. Lett. **46** (1981), 1.
20. H. Haken, Rev. Mod. Phys. **47** (1975), 63.
21. R. J. Glauber, Phys. Rev. **131**(1963), 2766.
22. P. Corruthers and M. M. Nieto, Rev. Mod. Phys. **40** (1968), 411.